

## Моделирование взаимодействия конформационных возмущений с носителями заряда в молекуле ДНК

Семерикова Мария Андреевна

Мельников Владислав Юрьевич

Башикирский государственный университет

Закирьянов Фарит Кабирович, к.ф.-м.н.

[semerikova.mary@yandex.ru](mailto:semerikova.mary@yandex.ru)

Проблема переноса заряда в молекуле ДНК является чрезвычайно актуальной. Интерес к этой проблеме связан прежде всего с возможностью использования цепочек ДНК в перспективных устройствах нанобиоэлектроники. Экспериментальное исследование динамики переноса заряда в ДНК началось лишь в начале 90-х годов XX в. В настоящее время проведено много различных экспериментов по переносу, интерпретации которых посвящено большое число теоретических работ.

В работе [1] теоретически показано, что при локальном внешнем интенсивном возбуждении решетки ДНК возможно образование бризеров на движущихся фронтах возникшего вследствие нелинейности решетки баббля. Эти бризеры в состоянии захватывать внешний электрон и перемещать его вдоль решетки. Характерное время существования связанного состояния «бризер-электрон» порядка 20–30 периодов осцилляций сайтов решетки. Характерная длина смещения  $\sim 20$  сайтов. Максимальная вероятность обнаружить электрон в движущемся бризере  $\sim 0.2$ .

В данной работе нами рассмотрена динамика переноса заряда в модели молекулы ДНК с учетом трения [2]. Движение описывается уравнениями:

$$\begin{cases} \ddot{U}_n = S(U_{n+1} - 2U_n + U_{n-1}) - \gamma \dot{U}_n (e^{-\beta U_n} - 1) e^{-\beta U_n} - b_n^2 A \\ \dot{b}_n = r_{n+1} + q_{n-1}b_{n-1} - (r_n + q_n)b_n \end{cases}$$

Начальное конформационное возмущение задавалось в виде солитонной пары «кинк-антикинк», центр которого приходился на 50-й сайт (Рис. 1).

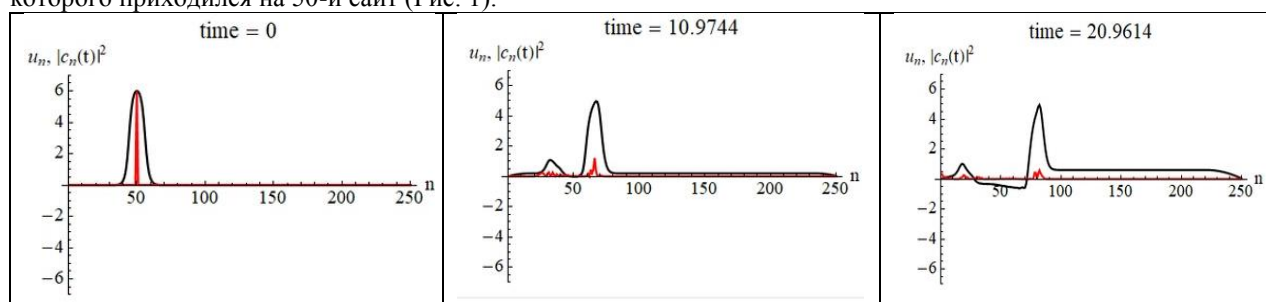


рис. 1. Прохождение заряда в различных момент времени.

Устанавливая различные значения параметра связности решетки  $S$ , а так же коэффициента трения  $\gamma$ , мы наблюдали различные картины прохождения заряда из которых можно сделать вывод, что движение заряда коррелирует с движением конформационного возмущения.

Список публикаций:

[1]. Лахно В.Д., Четвериков А.П. Возбуждение бабблов и бризеров в ДНК и их взаимодействие с носителями заряда. Математическая биология и биоинформатика. 2014. Т. 9. № 1. С. 4–19.

[2]. Закирьянов Ф.К., Мельников В.Ю. Моделирование процесса переноса заряда в молекуле ДНК. Тезисы 26-й международной конференции «Математика. Компьютер. Образование». Пуцино, 28.01.–02.02. 2019. Изд. «Институт компьютерных исследований». Москва, Ижевск, 2019. – с. 36.

## Влияние токов утечки на изменение электрического импульса при стимуляции вестибулярных нервов

Суюндукова Алмагуль Туктаровна

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Демкин Владимир Петрович, д.ф.-м.н.

[almagul.suyundukova@mail.ru](mailto:almagul.suyundukova@mail.ru)

Вестибулярная система человека является важной сенсорной системой, отвечающей за обработку и передачу в головной мозг информации о положении тела и его перемещении в пространстве. Сенсорные устройства – волосковые клетки вестибулярной системы генерируют последовательность электрических импульсов, частота и амплитуда которых зависят от величины линейных и угловых ускорений головы. Эти

импульсы, через синаптическую связь по нервам поступают в вестибулярные ядра продолговатого мозга и обрабатываются для формирования сигналов, обеспечивающих стабилизацию глаз и тела. Таким образом, рецепторы волосковых клеток конвертируют энергию механических стимулов в серию потенциалов действия, поступающих в центральную нервную систему [1].

В случае, когда заболевания и патологические процессы в органах внутреннего уха [2] приводят к потере сенсорной функции вестибулярного органа, возникает необходимость его замещения биотехнической системой – вестибулярным имплантом (ВИ).

В настоящее время эффективных способов лечения вестибулярной дисфункции не существует, имеется только ряд методик снижающих симптомы заболевания, персональные комплексы активных реабилитационных упражнений, отказ от применения лекарств, негативно влияющих на вестибулярную систему. В свою очередь клинические испытания на животных показали возможность восстановления функциональности вестибулярной системы посредством прямой электрической стимуляции вестибулярного нерва. В этом случае актуальным является нахождение оптимального режима электрической стимуляции вестибулярного нерва, то есть задание формы и амплитудно-частотных параметров импульса тока для улучшения передаточной функции, что рассматривается как актуальная задача, так как ее решение позволяет совершенствовать вестибулярный имплант, а значит и качество жизни имплантированного пациента.

Стимулирующий электрический импульс от электрода, проходя через ткани вестибулярного органа, испытывает влияние импеданса биологической ткани, что приводит к изменению его фазовых характеристик. Следует отметить, что расположение стимулирующих электродов, передающих импульсы тока в афферентный нерв, является одной из важных причин, влияющих на качество импланта, поскольку ткани вестибулярного лабиринта представляют собой сложную по химическому составу проводящую многокомпонентную гетерогенную среду, различающуюся по электропроводным и диэлектрическим свойствам. Кроме того, при подаче импульса тока от вестибулярного импланта на один из электродов, между электродами и вестибулярными нервами возникают токи утечки, которые могут ухудшать качество прямого стимулирующего сигнала.

В связи с этим, целью данного исследования является определение влияния межэлектродных токов утечки на изменение амплитудно-частотных характеристик прямых стимулирующих импульсов от электрода при прохождении их через ткани вестибулярного органа.

Для изучения механизмов распространения токовых импульсов вестибулярного импланта в работе [3] была разработана электрическая схема замещения биологических тканей с учетом анатомической структуры внутреннего уха.

В работе [4] нами показано, что суммарный сигнал, приходящий в ганглию Скарпы на вестибулярный нерв зависит от сигналов, исходящих от всех стимулирующих электродов, амплитудно-фазовые характеристики этого сигнала определяются их векторной суммой. Причиной этого эффекта является наличие токов утечки, которые возникают в электропроводящей ткани вестибулярного лабиринта.

Проведенные нами численные и лабораторные эксперименты на лабораторных животных показали, что между электродами возникают токи утечки при прохождении прямого стимулирующего сигнала от ампулы вестибулярного аппарата до окончания вестибулярного нерва. Получены межэлектродные сдвиги фаз для импульсов от трех электродов. Показано, что формирование компенсирующих импульсов тока на соседние электроды с учетом межэлектродных сдвигов фаз дает возможность исключить влияние токов утечки на прямой стимулирующий импульс и улучшить работу вестибулярного импланта.

Результаты исследования получены при поддержке программы повышения конкурентоспособности ТГУ.

Список публикаций:

- [1] Демкин В. П., Щетинин П. П., Мельничук С. В., Кингма Г., Р. Ван Де Берг, Плешков М. О., Старков Д. Н. // *Известия высших учебных заведений. Физика*. 2017. Т.60. №11. С.152 – 157.
- [2] Lloret-Villas A., Varusai T.M., Juty N., Laibe C., Le Novère N., Hermjakob H., Chelliah V. // *Pharmacol*. 2017. Vol. 6. P. 73 – 86.
- [3] Зуев А. Л., Судаков А. И., Шакиров Н.В. // *Российский журнал биомеханики*. 2014. Т.18. №4. С.491-497.
- [4] Суюндукова А. Т., Демкин В. П., Мельничук С. В. // *III Международная научная конференция по проблемам управления в технических системах (CTS'2019). Сборник докладов. Санкт-Петербург. 30 октября – 1 ноября 2019 г. СПб.: СПбГЭТУ «ЛЭТИ»*. С. 213 – 215.